パイエルス系のソリトンと電子状態

和田　靖（東大理）

§1　はじめに

パイエルス系のソリトンについては数年前から数多い研究がなされて来た。最近の面白い仕事の一つとして北大のグループによるorthorhombicな TaS_3 の電気伝導度の測定がある。[1] この物質は218Kでパイエルス転移を起し，低温の半導体相でcommensurateな波数（N = 4）をもつCDWが形成される。一次元軸方向の伝導度は80K以下で新たな活性化エネルギー250Kで特徴づけられる。そしてこれは位相ソリトンの生成エネルギー E_0 であろうと推測されている。活性化型の電気伝導度は指数関数の前にprefactorがあるが，この大きさは北大の実験によると $52\,\Omega^{-1}cm^{-1}$ の程度である。このprefactorはソリトンの易動度が判れば求められる。和田－石内[2]はsine Gordon系で表わされたCDWのソリトンとphasonの非線型相互作用によるソリトンの拡散係数を低温で求めた。それからEinsteinの関係を仮定して易動度を評価したところ，prefactorは40Kで $34\,m_e/m\ \Omega^{-1}cm^{-1}$ となった。m_e と m は自由電子とバンド内電子の質量である。実験値との一致はかなりよいと云える。但しこゝで E_0 としては実測値を用いて解析している。一方 E_0 の値自体Lee, Rice, Anderson[3]の理論を用いてcommensurability energyの大きさを見積ればまって34Kぐらいの大きさとなる。実験値との不一致の原因としてバンド質量を自由電子質量にとっていること，chain内のクーロン相互作用を無視していることなどがあげられているが[1]，こゝではもう一つの原因の可能性を指摘したい。

§2　CDWの復習

1次元電子系ではCDWによって電子密度は

$$\rho = \rho_0(1+\alpha\cos(Qx+\phi(x))), \qquad Q = 2k_F \tag{1}$$

と空間変化する。この変化によって電子に対して附加的なポテンシャル

$$V(x) = 2\Delta\cos(Qx+\phi(x)) \tag{2}$$

が生ずる。これから話を簡単にするために TaS_3 とは離れるが，格子にincommensurateなCDWを考えることにしよう。(2)のポテンシャル中の電子問題は $\phi=0$ でhalf-filled-bandの場合Rice－Strässler[4]によって論じられた。又 ϕ の一次の項までとった電子とphasonの散乱はBanik－Conwell[5]によって調べられた。こゝでは ϕ が静止ソリトンであるときを考える。

CDWにピンどめの機構があると，そのハミルトニアンは

$$H_{CDW} = A\int\frac{dx}{\ell}\left\{\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2 + \frac{c_0^2}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2 + \omega_0^2(1-\cos\phi)\right\} \tag{3}$$

と書ける。[6] ℓ は格子間隔，c_0 はphasonの速度，ω_0^2 はピンどめの強さを表わす。(3)から ϕ はsine Gordon方程式

$$\partial^2\phi/\partial t^2 - c_0^2\,\partial^2\phi/\partial x^2 + \omega_0^2\sin\phi = 0 \tag{4}$$

をみたす。この方程式は静止ソリトン解

$$\phi(x) = 4\tan^{-1}[\exp(\omega_0 x/c_0)] \tag{5}$$

をもち，そのエネルギーは

$$E_0 = 8A c_0 \omega_0 / l \tag{6}$$

である。(5)を(2)へ代入すれば、ソリトンが存在する時のポテンシャルとして

$$V(x) = 2\Delta[(1-2\,\mathrm{sech}^2 y)\cos Qx + 2\,\mathrm{sech}\,y\,\tanh y\,\sin Qx], \quad y = \omega_0 x / c_0 \tag{7}$$

が得られる。

§3 Tight binding 近似

CDWをひき起す格子歪のない unperturbed lattice による周期ポテンシャルを U とおくと、電子状態は

$$(-\hbar^2/(2m)\cdot d^2/dx^2 + U(x) + V(x))\,\psi(x) = E\,\psi(x) \tag{8}$$

によってきまる。これを次の tight binding 近似によって解く。

$$\psi(x) = N^{-1/2}\sum_{j=1}^{N} f_j\,\Phi(x-x_j) \tag{9}$$

Φ は原子の波動関数で

$$(-\hbar^2/(2m)\cdot d^2/dx^2 + u(x))\,\Phi(x) = \varepsilon_a\,\Phi(x) \tag{10}$$

こゝで u は原子内ポテンシャルである。波動関数の小さな重なりを無視すれば(8)は

$$\varepsilon_1(f_{i+1} + f_{i-1}) + (\varepsilon_a + v_i - E)f_i = 0 \tag{11}$$

$$\varepsilon_1 = \int \Phi(x+l)(U(x) - u(x))\Phi(x)\,dx$$

$$v_i = \int \Phi(x) V(x+x_i)\Phi(x)\,dx \simeq \Delta[h_Q \exp(iQx_i - i\varphi(y_i)) + \text{c.c.}]$$

$$\exp(-i\varphi(y)) = 1 - 2\,\mathrm{sech}^2 y - 2i\,\mathrm{sech}\,y\,\tanh y, \quad h_Q = \int dx\,\Phi(x)^2 \exp(iQx)$$

となる。こゝで $l\omega_0/c_0 \sim 1/20$ でソリトンの広がりが大きいため y による V の変化は無視した。f_i を

$$f_i = \alpha(y_i)\exp(ikx_i) + \beta(y_i)\exp(i(k-Q)x_i) \tag{12}$$

とおいて(11)に代入し、ゆっくり変わる α, β を展開し、早く変わる $\exp(ikx_i)$ と $\exp(i(k-Q)x_i)$ の係数をそれぞれ零とおくと

$$\begin{aligned}
&(\varepsilon_k - E)\alpha(y) + i\eta_k\,d\alpha/dy + \Delta h_Q \exp(-i\varphi(y))\cdot\beta(y) = 0, \\
&(\varepsilon_{k-Q} - E)\beta(y) + i\eta_{k-Q}\,d\beta/dy + \Delta h_Q^* \exp(i\varphi(y))\cdot\alpha(y) = 0, \\
&\varepsilon_k = \varepsilon_a + 2\varepsilon_1 \cos kl, \quad \eta_k = (2\varepsilon_1 l\omega_0/c_0)\sin kl
\end{aligned} \tag{13}$$

を得る。

$|y| \to \infty$, $\exp(-i\varphi) \to 1$ では定数解

$$\begin{aligned}
&E = E_k = (1/2)\left[\varepsilon_k + \varepsilon_{k-Q} \pm \sqrt{(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-Q})^2 + 4\Delta^2|h_Q|^2}\right] \\
&\alpha = \Delta h_Q / \sqrt{(E_k - \varepsilon_k)^2 + \Delta^2|h_Q|^2}, \quad \beta = (E_k - \varepsilon_k)\alpha / (\Delta h_Q)
\end{aligned} \tag{14}$$

であって、これは half-filled-band のとき Rice-Strässler [4] の解になる。

§4 電子状態とエネルギーシフト

(13)から β を消去すると

$$d^2\alpha/dy^2 + i(a - 2\,\mathrm{sech}\,y)\,d\alpha/dy + 2b\,\mathrm{sech}\,y\cdot\alpha = 0 \qquad (15)$$

$$a = (E_k - \varepsilon_k)/\eta_k + (E_k - \varepsilon_{k-Q})/\eta_{k-Q}, \quad b = (E_k - \varepsilon_k)/\eta_k$$

を得る。$k = k_F$ では $a = 0$ であるので、$b \sim c_0\Delta/(2\ell\varepsilon_1\omega_0) \sim 10\Delta/\varepsilon_1 \ll 1$ のときに

$$a \sim 0 \ll b \ll 1 \qquad (16)$$

の条件下で解いてみると、$y \lessgtr 0$ での解として

$$\alpha(y) = \alpha(\mp\infty)\,[\,1 - 2b\,\mathrm{sech}\,y - 2bi(\tanh y \pm 1)\,],$$

$$\beta(y) = ((E_k - \varepsilon_k)/\Delta h_Q)\exp(i\varphi(y))\cdot\alpha(\mp\infty)\,[\,1 - 2\,\mathrm{sech}^2 y - 2i\tanh y\,\mathrm{sech}\,y + 2b\{\mathrm{sech}\,y \pm 2\tanh y\,\mathrm{sech}\,y + i(\pm 1 \mp 2\,\mathrm{sech}^2 y + \tanh y)\}\,] \qquad (17)$$

となる。

この二つの解を $y=0$ でつなぐ条件は(13)を導くときの議論から求められる。もともと一つの方程式だった(11)から二つの式(13)を出した。従って $y=0$ での条件は二つの成分に分ける前の方程式に $\delta(y)$ という項が含まれていないことから、$y=0$ で $\eta_k\alpha + \eta_{k-Q}\beta$ が連続ということであることが判る。これから

$$\alpha(\infty)/\alpha(-\infty) = \exp(i\psi_k) \qquad (18)$$

とおくと

$$\psi_k = 4((E_k - \varepsilon_k)/\eta_k)\cdot(E_k - \varepsilon_k + \Delta h_Q)/(E_k - \varepsilon_k - \Delta h_Q) \qquad (19)$$

で、これは $|k| < k_F$ のとき k の符号と逆符号の値をもつ。波動関数に周期境界条件

$$f_{-N/2} = f_{N/2} \qquad (20)$$

を課すと

$$\alpha(-\infty)\exp(-ikN\ell/2) = \alpha(\infty)\exp(ikN\ell/2) \qquad (21)$$

で、(18)から

$$\exp(i(kL + \psi_k)) = 1, \quad L = N\ell, \quad k = (1/L)(2n\pi - \psi_k);\ n \text{ 整数} \qquad (22)$$

と波数が $-\psi_k/L$ だけシフトする。これによる電子系のエネルギーシフトは

$$\Delta E = 2\sum_{|k|<k_F}(\,E_k(\text{シフトしたもの}) - E_k(\text{シフトしないもの})\,)$$

$$= 2\sum_{|k|<k_F}(-\psi_k/L)\,\partial E_k/\partial k = -(1/\pi)\int_{-k_F}^{k_F} dk\,\psi_k\,\partial E_k/\partial k \qquad (23)$$

でこれは正の量である。この電子系のエネルギーシフトはソリトンの自己エネルギーとして、(6)に加えられるべき量である。

§5 まとめ

ソリトンのエネルギーの実測値とのずれの一因として、ソリトンによる電子波数のずれの可能性を指摘した。ただし(16)の近似など問題は多く残っている。

1) 伊土政幸: 日本物理学会誌 36 (1981) 826.
2) Y. Wada and H. Ishiuchi : J. Phys. Soc. Jpn. 投稿中
3) P.A. Lee, T.M. Rice, and P.W. Anderson : Phys. Rev. Letters 31 (1973) 462.
4) M.J. Rice and S. Strässler : Solid State Comm. : 13 (1973) 125.
5) N.C. Banik and E.M. Conwell : Phys. Rev. B23 (1981) 5638.
6) M.J. Rice, A.R. Bishop, J.A. Krumhansl, and S.E. Trullinger : Phys. Rev. Letters 36 (1976) 432.